

# Резонансное кулоновское рассеяние на мелких донорах в квантовых ямах $\text{AlGaAs}/n\text{-GaAs}/\text{AlGaAs}$

© В.Я. Алешкин, Д.И. Бурдейный<sup>†</sup>

Институт физики микроструктур Российской академии наук,  
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 28 апреля 2012 г. Принята к печати 30 мая 2012 г.)

Теоретически исследуются характеристики кулоновского рассеяния электронов проводимости на мелких донорных центрах в гетероструктурах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/n\text{-GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  с квантовыми ямами при учете влияния резонансных состояний. Резонансные состояния возникают под возбужденными подзонами размерного квантования вследствие наличия доноров. Найдены асимметричные резонансные особенности в спектрах полного и транспортного сечений кулоновского рассеяния в окрестности резонансных значений энергии. Показано, что особенности не являются малым эффектом: вблизи резонансных значений энергии сечения могут в несколько раз отличаться от соответствующих величин для нерезонансного случая.

## 1. Введение

В достаточно чистых объемных полупроводниковых образцах и в гетероструктурах с квантовыми ямами при низкой температуре рассеяние на заряженных примесях становится основным механизмом рассеяния электронов, обеспечивающим релаксацию импульса. Поэтому особенности в спектре кулоновского рассеяния могут оказаться вполне заметными в экспериментальных наблюдениях.

Особенности рассеяния на заряженных примесях, рассмотрению которых посвящена эта работа, связаны с наличием резонансных состояний доноров в полупроводниковых гетероструктурах с квантовой ямой. Хорошо известно, что резонансные состояния приводят к особенностям сечений рассеяния электронов, значения энергии которых близки к резонансным [1]. Резонансными в рассматриваемом случае являются состояния, находящиеся в непрерывном спектре первой подзоны размерного квантования под дном второй подзоны (см., например, обзор [2]).

Особенности рассеяния на различных резонансных состояниях в полупроводниках неоднократно рассматривались ранее. Например, в работе [3] обнаружено резонансное рассеяние дырок на примесных атомах таллия в полупроводнике  $\text{PbTe}$  (см. также обзор [4]), посвященный резонансному рассеянию носителей тока в полупроводниках типа  $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ ). В работе [5] теоретически рассмотрено резонансное рассеяние дырок на мелких акцепторах в одноосно-сжатых полупроводниках, вычислена амплитуда резонансного рассеяния. В работе [6] было рассмотрено резонансное кулоновское рассеяние в объемных образцах, легированных мелкими донорами. В этом случае резонансные состояния возникают благодаря взаимодействию электронов с продольными оптическими фононами.

Если ширина квантовой ямы такова, что расстояние по энергии между двумя нижними подзонами размерного квантования меньше энергии продольного оптического

(ЛО) фонона (расстояние между уровнем Ферми и дном нижней подзоны тоже меньше энергии ЛО-фонона), то рассеяние электронов с кинетической энергией меньше расстояния между нижними подзонами с испусканием ЛО-фонона не будет происходить. В этих условиях при низких температурах в чистых полупроводниках существенным является только рассеяние на заряженных примесях (рассеяние на акустических фононах гораздо менее вероятно). Оказывается, что резонансная поправка к сечению рассеяния на заряженном примесном центре для состояний, близких по энергии к резонансным состояниям, может превосходить нерезонансное сечение в несколько раз.

## 2. Вычисление амплитуды рассеяния для двумерного потенциала $(-1/\rho)$

Рассмотрим двумерное рассеяние на центрально-симметричном потенциале  $U(\rho)$ . В дальнейшем нам потребуется кулоновский потенциал  $(-1/\rho)$ , поэтому используем атомные единицы длины и энергии:

$$L_{at} = \frac{\hbar^2}{e^2 m_0}, \quad E_{at} = \frac{e^4 m_0}{\hbar^2}, \quad (1)$$

$m_0$  — масса свободного электрона. В этих единицах волновое число электрона связано с энергией в непрерывном спектре соотношением  $k^2 = 2E$ .

В случае достаточно быстро спадающих при  $\rho \rightarrow \infty$  потенциалов на больших расстояниях от рассеивающего центра волновая функция имеет вид

$$\psi(\rho, \theta) \propto \exp(ikx) + f(\theta) \cdot \rho^{-1/2} \exp(ik\rho), \quad (2)$$

используются полярные координаты  $(\rho, \theta)$ , так что  $x = \rho \cos \theta$ . Отметим, что дифференциальное сечение в двумерной задаче

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (3)$$

имеет размерность длины.

<sup>†</sup> E-mail: burdeiny@ipm.sci-nnov.ru

Обозначим через  $m$  проекцию момента импульса на ось  $Oz$ , измеренную в единицах  $\hbar$ . Радиальная часть волновой функции состояния с проекцией момента  $m$  имеет при  $\rho \rightarrow \infty$  асимптотику

$$R_{2D}(k, m, \rho) \propto \rho^{-1/2} \sin(k\rho - |m|\pi/2 + \pi/4 + \beta_m), \quad (4)$$

где  $\beta_m$  — фазы рассеяния. Формула (4) справедлива только для достаточно быстро спадающих при  $\rho \rightarrow \infty$  потенциалов (кулоновский потенциал  $(-1/\rho)$  к таковым не относится, к этому случаю мы перейдем далее). Можно показать [7], что амплитуда рассеяния следующим образом связана с фазами рассеяния:

$$f(\theta) = (2i\pi k)^{-1/2} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} [\exp(2i\beta_m) - 1] \exp(im\theta). \quad (5)$$

Для кулоновского потенциала  $(-1/\rho)$  при  $\rho \rightarrow \infty$  радиальные части волновых функций имеют вид

$$R_{2D}(k, m, \rho) \propto \rho^{-1/2} \sin(k\rho + 1/k \cdot \ln 2k\rho - |m|\pi/2 + \pi/4 + \gamma_m), \quad (6)$$

где

$$\gamma_m = \arg\Gamma(|m| + 1/2 - i/k), \quad (7)$$

$\Gamma(z)$  — гамма-функция. Таким образом, в асимптотике (6) невозможно ввести в соответствии с (4) фазу рассеяния, не зависящую от  $\rho$ . Роль  $\beta_m$  из (4) играет сумма  $(1/k \cdot \ln 2k\rho + \gamma_m)$ .

Для вычисления амплитуды рассеяния можно пользоваться выражением (5) и для кулоновского потенциала, в котором в качестве фаз используются  $\gamma_m$ , однако в этом случае его необходимо модифицировать, чтобы обеспечить сходимость ряда. Для этого заметим, что одно из возможных разложений  $\delta$ -функции имеет вид

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} \exp(im\theta) = 2\pi \cdot \delta(\theta). \quad (8)$$

Будем рассматривать углы рассеяния  $\theta \neq 0$ , так что единицу, вычитаемую из экспоненты в формуле (5), можно заменить на произвольное не зависящее от  $m$  комплексное число. С использованием равенства  $\beta_m \equiv \beta_{-m}$  амплитуду рассеяния можно представить в виде

$$f(\theta) = (2i\pi k)^{-1/2} \sum_{m=0}^{+\infty} (2 - \delta_{m,0}) [\exp(2i\beta_m) - A] \cos(m\theta), \quad (9)$$

где  $A$  — произвольная комплексная константа, не зависящая от  $m$ . Далее, из всех фаз  $\beta_m$  можно вычесть постоянную величину, при этом амплитуда рассеяния лишь приобретает несущественный постоянный фазовый множитель:

$$f(\theta) = (2i\pi k)^{-1/2} \times \sum_{m=0}^{+\infty} (2 - \delta_{m,0}) [\exp(2i(\beta_m - B)) - A] \cos(m\theta). \quad (10)$$

Выберем величину  $B$  следующим образом:

$$B = \beta_0 - \arg\Gamma(1/2 - i/k). \quad (11)$$

Разность  $(\beta_m - B)$  имеет смысл для кулоновского потенциала  $(-1/\rho)$ , для которого каждая  $\beta_m$  по отдельности содержит  $1/k \cdot \ln(2k\rho)$ :

$$\beta_m - B = \gamma_m = \arg\Gamma(|m| + 1/2 - i/k). \quad (12)$$

Для численных расчетов можно использовать приближенную формулу

$$f(\theta) \approx (2i\pi k)^{-1/2} \times \sum_{m=0}^M (2 - \delta_{m,0}) [\exp(2i\gamma_m) - \exp(2i\gamma_M)] \cos(m\theta). \quad (13)$$

Для кулоновского потенциала  $(-1/\rho)$  в двумерном случае известна амплитуда рассеяния в аналитическом виде [7]:

$$f^{(\text{Coul})}(\theta) = \frac{\Gamma(1/2 - i/k) \exp[2i/k \cdot \ln \sin(\theta/2)]}{\Gamma(i/k) (2ik)^{1/2} \sin(\theta/2)}. \quad (14)$$

Вычисления по формуле (13) показывают, что с увеличением верхнего предела суммирования  $M$  величина (13) приближается к точной амплитуде рассеяния (14). Например, при  $M = 10^5$ ,  $k = 2.0$  получается  $|f(\theta) - f^{(\text{Coul})}(\theta)|/|f^{(\text{Coul})}(\theta)| \leq 8 \cdot 10^{-3}$  при всех  $\theta \geq 10^{-3}$ . Отметим, что скорость сходимости возрастает, если избавиться от мелкомасштабных осцилляций в действительной и мнимой частях приближенной амплитуды рассеяния (13). Этого можно добиться, усреднив вычисляемую сумму в (13) по периоду  $2\pi/(M+1)$  первого отброшенного косинуса  $\cos((M+1)\theta)$ . После выполнения такого усреднения при, например,  $M = 3 \cdot 10^4$ ,  $k = 2.0$  получается  $|f(\theta) - f^{(\text{Coul})}(\theta)|/|f^{(\text{Coul})}(\theta)| \leq 4 \cdot 10^{-3}$  при всех  $\theta \geq 10^{-3}$ . Аналогичный прием для вычисления амплитуды рассеяния использовался в работе [6] для трехмерного случая.

Далее нам потребуется вычислять амплитуду рассеяния для некоторого потенциала  $\tilde{U}(\rho)$ , отличного от  $(-1/\rho)$ , но свойства  $\tilde{U}(\rho)$  таковы, что в этом потенциале фазы рассеяния для нескольких первых значений проекции момента  $m = 0, 1, \dots, m_{\max}$  заметно отличаются от фаз в случае  $(-1/\rho)$ , но для остальных проекций момента фазы рассеяния очень близки к фазам в случае  $(-1/\rho)$ . В такой ситуации вычисление приближенной амплитуды рассеяния (13) упрощается:

$$f(\theta) = f^{(\text{Coul})}(\theta) + (2i\pi k)^{-1/2} \times \sum_{m=0}^{m_{\max}} (2 - \delta_{m,0}) [\exp(2i(\beta_m - B)) - \exp(2i\gamma_m)] \cos(m\theta). \quad (15)$$

Здесь  $B$  — число, определенное формулой (11),  $\beta_m$  — фазы рассеяния для потенциала  $\tilde{U}(\rho)$ , а  $\gamma_m$  определены формулой (7). Формула (15) означает, что для потенциала  $\tilde{U}(\rho)$  с описанными выше свойствами амплитуду рассеяния можно найти как достаточно быстро вычисляемую поправку к выражению (14).

### 3. Резонансные состояния электрона в квантовой яме и фазы рассеяния

Рассмотрим квантовую яму (КЯ), плоскость которой перпендикулярна оси  $Oz$ . Гамильтониан электрона проводимости в КЯ в приближении эффективной массы имеет вид (в размерных единицах)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_{\parallel}^2}{2m^*} + \frac{\hat{p}_{\perp}^2}{2m^*} + U(z) + V(\rho, z), \quad (16)$$

где  $m^*$  — эффективная масса электрона на дне простой зоны проводимости,  $U(z)$  — прямоугольный потенциал (профиль КЯ),  $V(\rho, z)$  — потенциал мелкого донора. Приближенно полагаем, что значения эффективных масс  $m^*$  в КЯ и в барьерах совпадают и что низкочастотные диэлектрические постоянные  $\kappa_0$  тоже совпадают.

При отсутствии экранировки потенциал донора имеет вид (в размерных единицах)

$$V(\rho, z) = -\frac{e^2}{\kappa_0 \sqrt{\rho^2 + (z - z_{\text{imp}})^2}}, \quad (17)$$

где  $z_{\text{imp}}$  —  $z$ -компонента радиус-вектора примеси. Квантовыми числами для волновых функций в непрерывном спектре (НС) являются проекция момента  $m$  и энергия  $E$ . Волновая функция с квантовыми числами  $m$  и  $E$  может быть представлена в виде

$$\Psi_{mE}(\rho, \theta, z) \approx \exp(im\theta) \sum_{s=1}^{l_0} \phi_s(z) \psi_{ms}(\rho), \quad (18)$$

$l_0$  — количество учитываемых подзон размерного квантования (индекс  $s = 1, 2, \dots, l_0$ ). Знак приближенного равенства в (18) означает, что учтены не все подзоны, а также состояния непрерывного спектра. Выбираем одномерные подзонные волновые функции так, чтобы они удовлетворяли условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_t^*(z) \phi_s(z) dz = \delta_{st}. \quad (19)$$

Перейдем к кулоновским единицам длины и энергии:

$$L_{\text{Coul}} = \frac{\hbar^2 \kappa_0}{e^2 m^*}, \quad E_{\text{Coul}} = \frac{e^4 m^*}{\hbar^2 \kappa_0^2}. \quad (20)$$

Система уравнений для радиальных функций принимает вид

$$\psi_{mt}''(\rho) + \frac{1}{\rho} \psi_{mt}'(\rho) + 2(E - E_t) \psi_{mt}(\rho) - \frac{m^2}{\rho^2} \psi_{mt}(\rho) - 2 \sum_{s=1}^{l_0} \psi_{ms}(\rho) W_{st}(\rho) = 0, \quad (21)$$

$$W_{st}(\rho) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_t^*(z) \phi_s(z) V^{(nd)}(\rho, z) dz, \quad (22)$$

$$s = 1, \dots, l_0, \quad t = 1, \dots, l_0,$$

где  $V^{(nd)}(\rho, z)$  — потенциал донора в кулоновских единицах.

Введем обозначение  $E_l$  для энергии уровня размерного квантования с номером  $l$  ( $l = 1, 2, \dots$ ). Нас интересуют энергии в интервале  $E_1 < E < E_2$ , т.е. в непрерывном спектре первой подзоны, но ниже дна второй подзоны (рис. 1). Если дно третьей подзоны заметно выше дна второй подзоны, то для приближенного вычисления волновых функций  $\Psi_{mE}(\rho, \theta, z)$  в формуле (18) можно ограничиться двумя нижними подзонами:  $s = 1, 2$ . Функция  $\psi_{m2}(\rho)$  является локализованной, для нее ставится граничное условие  $\psi_{m2}(\rho \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ . Функция  $\psi_{m1}(\rho)$  является, напротив, делокализованной.

Используя определение  $W_{st}(\rho)$  из (22), нетрудно показать, что

$$W_{11}(\rho \rightarrow 0) \propto \ln \rho, \quad W_{11}(\rho \rightarrow \infty) \approx -\frac{1}{\rho}. \quad (23)$$

Отсюда следует, что при  $\rho \rightarrow \infty$  уравнение для  $\psi_{m1}(\rho)$  из системы (21) переходит в уравнение для одной радиальной волновой функции (так как  $\psi_{m2}(\rho)$  исчезающе мала) в потенциале, очень близком к  $(-1/\rho)$ . При больших значениях проекции момента  $|m| \gg 1$  функция  $\psi_{m1}(\rho)$  мала в области вблизи начала координат (и эта область расширяется с увеличением  $|m|$ ). Поэтому при достаточно больших  $|m|$  решение для  $\psi_{m1}(\rho)$  близко к одноподзонному решению в кулоновском потенциале  $(-1/\rho)$  при всех  $\rho$ . Таким образом, фаза решения для  $\psi_{m1}(\rho)$  при  $|m| \gg 1$  близка к фазе двумерной кулоновской функции в потенциале  $(-1/\rho)$  для соответствующей проекции момента  $m$ . Характерный пример из численных расчетов: при энергии  $E \approx E_2 - 0.3(E_2 - E_1)$  и  $|m| = 8$  фаза численного решения в потенциале КЯ отличается от фазы кулоновского решения в потенциале  $(-1/\rho)$  меньше чем на 0.01. Естественно, фаза  $\psi_{m1}(\rho)$  и фаза  $\Psi_{mE}(\rho, \theta, z)$  — это всегда одна и та же величина (поскольку функция  $\psi_{m2}(\rho)$  является локализованной).

Итак, при  $|m| > 8$  искомые фазы состояний  $\Psi_{mE}(\rho, \theta, z)$  близки к фазам в потенциале  $(-1/\rho)$ . Если же  $|m| \leq 8$ , то отличие реального эффективного потенциала КЯ от  $(-1/\rho)$  и наличие в системе (21) локализованной функции второй подзоны приводит к тому, что необходимо учесть отличие фаз от аналогичных величин для случая  $(-1/\rho)$ . Следовательно, можно пользоваться формулой (15), положив верхний предел суммирования  $m_{\text{max}} = 8$ .

Типичная энергетическая диаграмма электронных состояний в КЯ изображена на рис. 1. Под дном самой нижней подзоны (первой) существует ряд уровней дискретного спектра (соответствующие состояния локализованы). А под дном второй подзоны существуют выделенные значения энергии, вблизи которых локализованная (по координате  $\rho$ ) часть разложения (18) велика по сравнению с локализованной частью при других энергиях (предполагаем, что при всех энергиях полная волновая функция  $\Psi_{mE}(\rho, \theta, z)$  из (18) нормирована одним и тем же способом в соответствии с правилами нормировки функций непрерывного спектра). Указанные

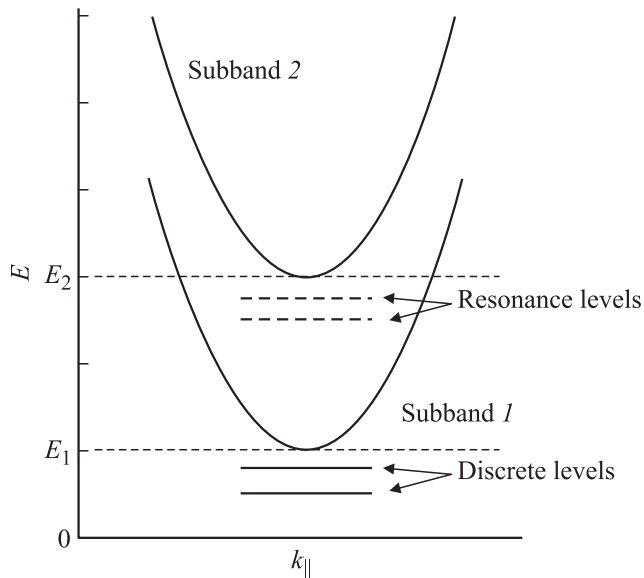


Рис. 1. Энергетическая структура КЯ.

выделенные значения энергии называются резонансными, они показаны штриховой линией на рис. 1. Приближенное решение радиальных уравнений (21) (учитываются только две нижние подзоны) дает фазу волновой функции  $\Psi_{mE}(\rho, \theta, z)$  в зависимости от энергии.

Кроме „резонансной“ ситуации, соответствующей рис. 1, мы рассмотрим для сравнения еще „нерезонансную“ ситуацию, когда учитывается только самая нижняя подзона размерного квантования. Это соответствует искусственному исключению второй подзоны на рис. 1 из рассмотрения (в системе (21) положим  $\psi_{m2}(\rho) \equiv 0$ ). Резонансных состояний, естественно, не возникает, поэтому все сечения рассеяния будут плавными функциями энергии  $E$  в интервале  $E_1 < E < E_2$ . Мы сравним фазы и спектры сечений рассеяния в резонансном и нерезонансном случаях.

#### 4. Результаты расчета фаз и сечений рассеяния

Для приближенного вычисления электронных волновых функций решается система (21) с  $s = 1, 2$ . После введения новых функций  $g_{mj}(\rho) \equiv \rho^{1/2}\psi_{mj}(\rho)$  ( $j = 1, 2$ ) из (21) получаем систему уравнений

$$\begin{cases} g_{m1}'' - \frac{m^2-1/4}{\rho^2} g_{m1} + 2(E - E_1)g_{m1} - 2W_{11}(\rho)g_{m1} - 2W_{12}(\rho)g_{m2} = 0, \\ g_{m2}'' - \frac{m^2-1/4}{\rho^2} g_{m2} + 2(E - E_2)g_{m2} - 2W_{22}(\rho)g_{m2} - 2W_{21}(\rho)g_{m1} = 0. \end{cases} \quad (24)$$

Функция  $g_{m1}(\rho)$  является делокализованной, так как  $E - E_1 > 0$ , а функция  $g_{m2}(\rho)$  является локализованной ( $E - E_2 < 0$ ). Слагаемые, содержащие  $W_{12}(\rho)$  и  $W_{21}(\rho)$ ,

обеспечивают связь между двумя учитываемыми подзонами. Последнее слагаемое в левой части первого уравнения в (24) приводит к появлению поправки к фазе делокализованной части  $g_{m1}(\rho)$  волновой функции.

Приведем результаты расчетов для конкретной гетероструктуры  $Al_{0.14}Ga_{0.86}As/n-GaAs/Al_{0.14}Ga_{0.86}As$ . Будем приближенно считать эффективные массы зон проводимости одинаковыми в яме и в барьерах ( $m^* = 0.0662m_0$ ). Разрыв зон проводимости для гетероперехода  $Al_xGa_{1-x}As/n-GaAs$  берем согласно [8] равным  $\Delta E_c(x) \approx 0.66 \cdot \Delta E_g(x)$ , тогда  $\Delta E_c(0.14) = 135$  мэВ. Ширина КЯ должна быть достаточно большой, чтобы расстояние между краями подзон размерного квантования ( $E_2 - E_1$ ) было меньше энергии оптического фотона  $\hbar\omega_{LO}$  (в противном случае особенности кулоновского рассеяния будут неразличимы на фоне более сильных особенностей, связанных с резонансным электрон-фононным взаимодействием с участием полярных оптических фононов). Последнее требование выполняется, например, при значении ширины КЯ  $d_{QW} = 200$  Å (а при  $d_{QW} \leq 150$  Å не выполняется). В этом случае ( $E_2 - E_1 \approx 28.6$  мэВ). Пусть примесь расположена на расстоянии  $0.3d_{QW}$  от гетерограницы. Низкочастотные диэлектрические константы приближенно считаем одинаковыми для ямы и барьеров ( $\kappa_0 = 12.46$ ).

На рис. 2 показана рассчитанная зависимость фазы ( $\beta_0 - B$ ) от энергии под второй подзоной. При прохождении через некоторые значения энергии фаза рассеяния скачком изменяется на  $\pi$  (из рис. 2 может показаться, что скачок происходит на меньшую величину, но это обусловлено только конечным разрешением по энергии при выполнении численных расчетов). Особенности зависимости фазы от энергии обусловлены резонансными состояниями под дном второй подзоны размерного квантования. Эти особенности отразятся и на спектрах сечений рассеяния.

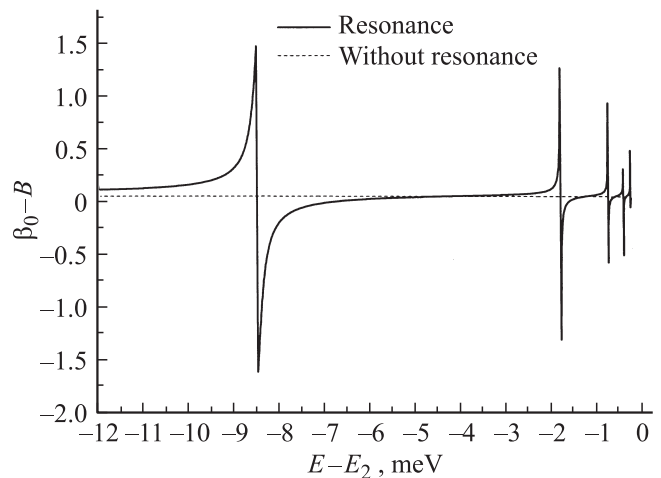


Рис. 2. Зависимость фазы ( $\beta_0 - B$ ) от энергии под второй подзоной. Сплошная кривая — фаза в двухподзонном приближении (с учетом резонансных состояний под дном второй подзоны), пунктирная — фаза в одноподзонном приближении (без учета резонансных состояний).

Перейдем теперь к анализу сечений рассеяния на одном донорном центре и их зависимостей от энергии. В безразмерных переменных для потенциала  $(-1/\rho)$  дифференциальное сечение равно [7]

$$|f^{(Coul)}(\theta)|^2 = \frac{1}{2k^2 \sin^2(\theta/2)} \text{th}(\pi/k). \quad (25)$$

Выражения для полного и транспортного сечений имеют вид [1]

$$\sigma_{tot} = \int_{\theta_{min}}^{2\pi-\theta_{min}} |f(\theta)|^2 d\theta, \quad \sigma_{tr} = \int_{\theta_{min}}^{2\pi-\theta_{min}} |f(\theta)|^2 (1 - \cos \theta) d\theta. \quad (26)$$

В пределы интегрирования в (26) введен минимальный угол рассеяния  $\theta_{min}$ , потому что прицельный параметр не может принимать сколь угодно больших значений (сечения могут расходиться за счет малых углов рассеяния; именно это происходит в случае кулоновского потенциала  $(-1/\rho)$ ). Для случая потенциала  $(-1/\rho)$  получается [7]:

$$\begin{aligned} \sigma_{tot}^{(Coul)}(k, \theta_{min}) &= 2k^{-2} \text{th}(\pi/k) \text{ctg}(\theta_{min}/2), \\ \sigma_{tr}^{(Coul)}(k, \theta_{min}) &= 2k^{-2} \text{th}(\pi/k) (\pi - \theta_{min}). \end{aligned} \quad (27)$$

Если распределение примесей характеризуется двумерной концентрацией  $N$ , то среднее расстояние (в плоскости КЯ) между примесными центрами можно оценить как  $N^{-1/2}$ , а максимальный прицельный параметр из классической задачи рассеяния — как  $\rho_{max}^{(Coul)} \approx 0.5 \cdot N^{-1/2}$ . Минимальный угол рассеяния связан с максимальным прицельным параметром и энергией следующим образом:

$$\theta_{min} = 2 \arctan \frac{1}{k^2 \rho_{max}^{(Coul)}}. \quad (28)$$

Обратные времена (частоты) рассеяния связаны с сечениями следующим образом:

$$\frac{1}{\tau(E)} = N v(E) \sigma(E). \quad (29)$$

Здесь  $v(E)$  — скорость электрона, получаемая из закона дисперсии:  $v(E) = p(E)/m^*$ . Если подставить в (29) сечение  $\sigma_{tot}$  или  $\sigma_{tr}$  из (26), то получается полная частота рассеяния  $1/\tau_{tot}$  или частота рассеяния импульса  $1/\tau_{tr}$  соответственно.

Обычно в легированных КЯ донорные центры находятся на различных расстояниях  $z$  от гетерограницы. Для корректного описания рассеяния на примесях необходимо учесть разброс по положению примесей вблизи некоторой плоскости  $z = z_0$ , параллельной границам КЯ. Для примера выберем гауссово распределение донорных центров

$$\Phi(z; z_0, \xi) = \frac{1}{\xi \sqrt{2\pi}} \left( -\frac{(z - z_0)^2}{2\xi^2} \right), \quad (30)$$

где  $z_0$  — математическое ожидание положений примесей, а  $\xi$  характеризует ширину распределения. Пусть

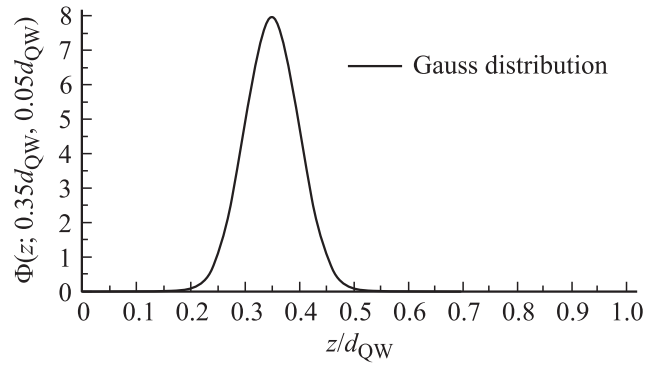


Рис. 3. Распределение донорных центров по положению в КЯ.

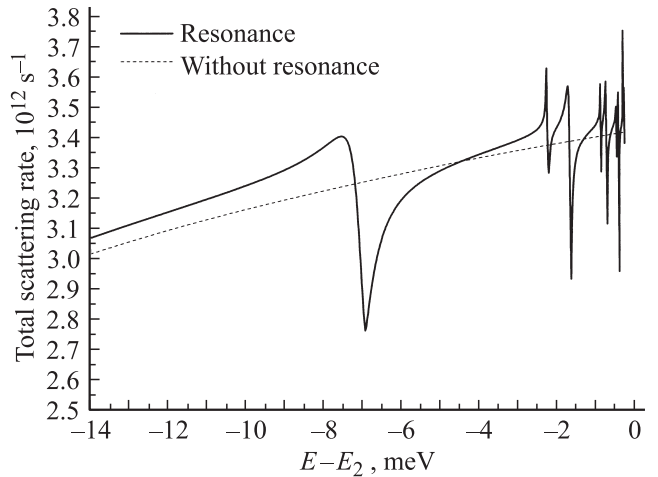


Рис. 4. Полная частота рассеяния в зависимости от энергии под второй подзоной.

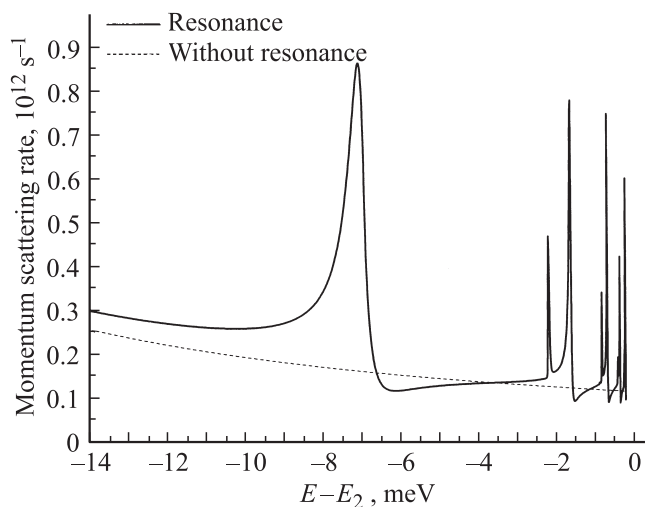


Рис. 5. Частота рассеяния импульса в зависимости от энергии под второй подзоной.

ширина КЯ равна  $d_{QW} = 200 \text{ \AA}$ , а разброс положений примесных центров  $\xi = 10 \text{ \AA}$  (в размерных единицах), т.е.  $\xi = 0.05d_{QW}$ . На рис. 3 изображено распределение доноров по положению в КЯ при  $z_0 = 0.35d_{QW}$  и выбранных значениях  $d_{QW}$  и  $\xi$ . Плоскости  $z = 0$  и  $z = d_{QW}$  соответствуют границам КЯ.

Можно рассчитать энергетические зависимости частот рассеяния при различных положениях  $z$  доноров, а затем усреднить полученные функции по распределению (30). Если выбрать значения параметров  $z_0 = 0.35d_{QW}$ ,  $\xi = 0.05d_{QW}$ , то для частот рассеяния получаются результаты, изображенные на рис. 4 и 5. Для примера выбрано только одно значение концентрации:  $N = 10^{10} \text{ см}^{-2}$  (для других концентраций графики выглядят качественно похожим образом).

## 5. Обсуждение результатов

Сравним характерные частоты кулоновского рассеяния с частотами рассеяния на акустических фононах. В полярном полупроводнике есть два механизма такого рассеяния: деформационное акустическое (DA) и пьезоакустическое (PA). Времена релаксации импульса и энергии при акустическом рассеянии двумерных носителей заряда были вычислены в работах Карпуса [9,10]. В этих работах найдены выражения для обратных времен релаксации в различных случаях, которые определяются соотношениями между следующими величинами: температура  $k_B T$ , энергия Ферми  $E_F$ , энергия нижнего уровня размерного квантования  $W$  и произведение  $8m^*s^2$  ( $s$  — скорость продольного звука в материале). Для температуры жидкого гелия и объемного GaAs имеем

$$k_B T \approx 0.362 \text{ мэВ}, \quad 8m^*s^2 \approx 0.068 \text{ мэВ}. \quad (31)$$

Если ширина КЯ  $d_{QW} = 200 \text{ \AA}$ , то

$$W \approx 10 \text{ мэВ}, \quad E_F \approx 30 \text{ мэВ} \quad (32)$$

(энергия Ферми в нашем случае должна находиться между дном первой и дном второй подзоны размерного квантования). Параметры (31) и (32) соответствуют области низких температур и области малоуглового рассеяния, так как выполнены условия [9,10]

$$k_B T < \sqrt{8m^*s^2W}, \quad k_B T < \sqrt{8m^*s^2E_F}. \quad (33)$$

Оценки дают значения  $1/\tau_{tr}^{(DA)}(E_F) \approx 2 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ , эта величина гораздо меньше, чем частоты кулоновского рассеяния ( $1/\tau_{tr}^{(Coul)} \approx 10^{11} \text{ с}^{-1}$  при концентрации  $N \approx 10^{10} \text{ см}^{-2}$ ). РА-рассеяние при низких температурах является несущественным для импульсной релаксации носителей по сравнению с рассеянием на статических дефектах (это указано в статье [10]). Вычисления дают оценку для полной частоты ДА-рассеяния:  $1/\tau_{tot}^{DA}(E_F) \approx 4 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ , т.е. полная частота того же порядка, что и частота рассеяния импульса. Для кулоновского рассеяния аналогично:  $1/\tau_{tr}^{(Coul)}$

и  $1/\tau_{tot}^{(Coul)}$  отличаются не более чем на порядок при  $N \approx 10^{10} \text{ см}^{-2}$ . (Естественно, при  $\theta_{min} \ll 1$  получилось бы  $\tau_{tr}^{(Coul)}/\tau_{tot}^{(Coul)} \gg 1$ , но при концентрации  $N = 10^{10} \text{ см}^{-2}$  значение  $\theta_{min} \approx 0.08$ ). Таким образом, для рассмотренного примера гетероструктуры с квантовой ямой при температуре жидкого гелия кулоновское рассеяние на заряженных донорных центрах является основным механизмом рассеяния электронов.

Теперь качественно обсудим вопрос экранировки. В квантовых ямах может оказаться существенной экранировка электронами потенциала заряженных доноров, и в таком случае эффективный потенциал, в котором движется один электрон, отличается от простого выражения (17). Экранированный потенциал должен на больших расстояниях спадать быстрее, чем  $1/\rho$ . Подробный анализ эффекта экранировки в инверсионном слое на границе полупроводника  $p$ -типа и диэлектрика выполнен в работе [7]. В этой работе получено интегро-дифференциальное уравнение для эффективного потенциала  $V(\rho, z)$ . Можно решить это уравнение и получить выражение для потенциала в квадратурах. Известно [11], что в двумерном случае при  $\rho \rightarrow \infty$  экранированный потенциал спадает в основном пропорционально  $1/\rho^3$ , но время вычисления одного значения потенциала  $V(\rho, z)$  для одного заданного положения примеси  $z_0$  оказалось велико. Нахождение волновых функций электрона в таком потенциале для большого числа различных положений донора — очень трудоемкая задача с точки зрения времени вычислений.

Поэтому мы ограничимся только качественными соображениями. Более быстрое спадание потенциала по сравнению с  $(-1/\rho)$  приведет к тому, что останется только конечное число резонансных состояний (не будет бесконечного числа резонансных уровней, сгущающихся к  $E = E_2 - 0$ ), а оставшиеся несколько увеличат энергию. Особенности сечений рассеяния вблизи высоковозбужденных резонансных состояний все равно не будут наблюдаемыми из-за неопределенности энергии электрона вследствие рассеяния на акустических фононах, поскольку ширина резонансных особенностей быстро уменьшается с увеличением энергии. Например, при характерной частоте рассеяния на акустических фононах  $1/\tau_{ac} \approx 4 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$  получается неопределенность энергии  $\Delta E = \hbar/\tau_{ac} \approx 3 \cdot 10^{-3} \text{ мэВ}$ . Поэтому зависимость частот рассеяния  $1/\tau_{tot}(E)$  и  $1/\tau_{tr}(E)$  от энергии вблизи нижнего резонансного состояния и нескольких возбужденных качественно не изменится и частоты по-прежнему будут выглядеть качественно, как изображено на рис. 4 и 5. Отметим, что без учета экранировки мы получаем завышенные величины для частот рассеяния. Если учесть экранировку, то характерные величины частот рассеяния понизятся, и резонансные особенности станут еще более ярко выраженными из-за того, что в случае экранировки рассеяние на очень малые углы будет играть меньшую роль.

Обсудим возможность экспериментального наблюдения резонансных особенностей в спектре кулоновского

рассеяния. Эти особенности рассеяния на заряженных примесях могут, вероятно, наблюдаться в виде особенностей в спектрах примесной фотопроводимости квантовой ямы. Примесная фотопроводимость пропорциональна не только концентрации неравновесных носителей, но и их эффективной подвижности. В условиях, когда основным механизмом рассеяния импульса является кулоновское рассеяние, а основным механизмом релаксации энергии — рассеяние на акустических фононах, электроны с большими энергиями могут давать заметный вклад в фотопроводимость. Поэтому в спектре примесной фотопроводимости при энергиях фотона, соответствующих возбуждению электрона с основного состояния примесного центра в состоянии первой подзоны со значениями энергии, близкими к резонансным, могут наблюдаться спектральные особенности. Хорошо известно, что в этой области спектра наблюдаются особенности, обусловленные переходами электронов с локализованных состояний в резонансные. Однако эти переходы эффективно идут только в том случае, когда имеется компонента электрического поля электромагнитной волны, направленная по нормали к квантовой яме ( $p$ -поляризация при наклонном падении света). Поэтому, для того чтобы исключить эти особенности, необходимо, чтобы вектор электрического поля электромагнитной волны лежал в плоскости квантовой ямы ( $s$ -поляризация при наклонном падении света).

## 6. Заключение

В настоящей работе выполнен теоретический расчет частот кулоновского рассеяния на мелких донорах в квантовой яме  $n$ -GaAs, окруженной барьерами  $Al_xGa_{1-x}As$ , при учете резонансных состояний электронов. Резонансные (квазистационарные) состояния обусловлены размерным квантованием электронов в рассматриваемой гетероструктуре. Найдены асимметричные особенности в спектрах полного и транспортного сечений (и соответствующих частот) кулоновского рассеяния в окрестности резонансных значений энергии. Спектральные особенности сечений рассеяния не являются малым эффектом.

Авторы благодарны А.А. Дубинову за выполненный расчет частоты рассеяния электронов на акустических фононах в квантовой яме.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант #10-02-00311-а) и программ РАН.

## Список литературы

- [1] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика (нерелятивистская теория)* (М., Наука, 1989).
- [2] В.Я. Алешкин, Л.В. Гавриленко, М.А. Одноблюдов, И.Н. Ясиевич. *ФТП*, **42**, 899 (2008).
- [3] В.И. Кайданов, С.А. Немов. *ФТП*, **15**, 542 (1981).

- [4] В.И. Кайданов, С.А. Немов, Ю.И. Равич. *ФТП*, **26**, 201 (1992).
- [5] М.А. Одноблюдов, И.Н. Ясиевич, В.М. Чистяков, К.А. Чжао. *Phys. Rev. B*, **62**, 2486 (2000).
- [6] V.Ya. Aleshkin, D.I. Burdeiny. *Semicond. Sci. Technol.*, **26**, 095 003 (2011).
- [7] F. Stern, W.E. Howard. *Phys. Rev.*, **163**, 816 (1967).
- [8] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys.*, **89**, 5815 (2001).
- [9] В. Карпус. *ФТП*, **20**, 12 (1986).
- [10] В. Карпус. *ФТП*, **22**, 439 (1988).
- [11] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., Мир, 1982).

Редактор Л.В. Беляков

## Resonance Coulomb scattering by shallow donors in AlGaAs/ $n$ -GaAs/AlGaAs quantum wells

V.Ya. Aleshkin, D.I. Burdeiny

Institute for Physics of Microstructures,  
Russian Academy of Sciences,  
603950 Nizhny Novgorod, Russia

**Abstract** We report a theoretical study on characteristics of the Coulomb scattering of conduction electrons by shallow donors in heterostructures  $Al_xGa_{1-x}As/n$ -GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$  with quantum wells, taking into account the effect of resonance states. The resonance states are formed under the excited dimensional quantization subbands owing to the shallow donors. The obtained spectra of total and transport Coulomb scattering cross-sections exhibit asymmetric resonance features in the vicinity of the resonance energy values. It is shown that these features are no small effect: near the resonance energy values the cross-sections may largely differ from the corresponding cross-sections for the non-resonance case.